引用信息: Jia Hong-Ying; Wang Ze-Xin. Acta Phys. -Chim. Sin., 2004, 20(02): 144-148 [贾红英; 王泽新. 物理化学学报, 2004, 20(02): 144-148]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

CO吸附在过渡金属铂表面的微观动力学研究

贾红英:王泽新

山东师范大学化学化工与材料科学学院,济南 250014

摘要:

建立了处理双原子分子-表面相互作用的推广的LEPS势.借助推广的LEPS势,系统研究了一氧化碳分子在铂低指数表面吸附的动力学特性,重现了低指数表面的分子吸附热、吸附几何及本征振动等实验数据;鉴定了某些不合理的文献信息,预测了实验尚未探测到的重要信息:预测到Pt(100)表面四重洞位的C - O伸缩振动频率为1 962.60 cm - 1;预测到Pt(110)表面吸附态的C - O及C - Pt键长分别为115.1、147 pm.

关键词: 推广的LEPS势 吸附 过渡金属 低指数表面

收稿日期 2003-06-18 修回日期 2003-09-26 网络版发布日期 2004-02-15

通讯作者: 王泽新 Email: wangzexin@sdnu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

# 扩展功能

本文信息

# PDF(1585KB)

### 服务与反馈

把本文推荐给朋友 加入我的书架 加入引用管理器

引用本文

Email Alert 文章反馈 浏览反馈信息

## 本文关键词相关文章

- ▶推广的LEPS势
- ▶吸附
- ▶过渡金属
- ▶低指数表面

### 本文作者相关文章

▶贾红英

▶ 王泽新